

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Базы данных и программные продукты в химической технологии

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки :

Цифровая химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2023

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП
А.С. Князев

Председатель УМК

Л.Н. Мишенина

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения.

ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

ПК-2 Способен к реализации и управлению химическими и биомедицинскими процессами на базе математического прогнозирования и моделирования.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК 1.3 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук.

ИОПК-3.3. Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ИПК 2.1 Применяет методы математического прогнозирования и управления отдельными стадиями химико-технологических процессов

2. Задачи освоения дисциплины

- Освоить основные программные комплексы в плане понимания специфики прикладного применения.
- Освоить способы подбора программного комплекса для выполнения практических задач.
- Освоить способы последовательной работы с фактическими данными для решения практических задач.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Второй семестр, экзамен

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам:

- Актуальные задачи современной химии (1 семестр)
- Основы системного анализа и моделирование технологических процессов;
- Основы проектирования химических и нефтехимических производств.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

-лекции: 16 ч.

-практические занятия: 16 ч.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Раздел 1. Неспециализированные программные пакеты

Тема 1. Математические пакеты программ

Excel. Mathcat. Matlab. Wolfram mathematica. Mapple. Statistica. Minitab.

Разбор основных возможностей программ, целей и задач, решаемых при использовании инструментов.

Тема 2. Базы данных

Excel. Access. SQL

Понятие базы данных, системы управления базами данных. Релиционные/нерелиционные СУБД, понятие, отличия, примеры использования.

Тема 3. Программирование

Basic. Fortran. Python. Элементы ActiveX.

Введение, отличия, сферы применения. Основные положения и алгоритмы. Примеры решаемых задач.

Раздел 2. Специализированные программные пакеты

Тема 4. Трубопроводы

Olga. PipeSIM. Fronex.

Обзор интерфейсов, преимуществ и недостатков программных продуктов. Примеры задач, решаемых с помощью данных инструментов.

Тема 5. Моделирование ХТС

AspenONE Engineering. ChemCAD. AVEVA PRO II.

Основные отличия, достоинства и недостатки программы. Сферы применения в промышленности, обзор примеров применения.

Тема 6. Электронные кульманы

AutoCAD

Обзор основных возможностей, достоинства и недостатки.

Тема 7. Задачи конструирования и 3D моделирования

Пассат. AutoCAD Inventor. Solidworks. КОМПАС-3D.

Основные возможности, отличия, достоинства и недостатки.

Тема 8. МКЭ

ANSYS. COMSOL.

Возможности, отличия, достоинства и недостатки. Разбор задач, решаемых с помощью данных программных продуктов.

Тема 9. ВМ

AVEVA. AutoPlant. Revit.

Возможности, отличия, достоинства и недостатки. Разбор задач, решаемых с помощью данных программных продуктов.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости лекций и практических занятий, проведения занятий с презентациями студентов по индивидуальному заданию и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен во втором семестре проводится в устной форме в виде ответа на билет. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа.

Первая часть представляет собой 2 теоретических вопроса, проверяющих ИОПК-1.3, ИОПК 3.3. Предоставляется развернутый ответ в устной форме.

Вторая часть содержит один вопрос, проверяющий ИОПК-1.3, ИОПК 3.3, ИПК-2.1 и оформлен в виде практического задания (постановка задачи, набор исходных данных). Ответ предоставляется в виде описания алгоритма выполнения поставленной задачи и используемых для выполнения задачи программных продуктов. Допускается вариативность ответа.

Примерный перечень теоретических вопросов:

1. Программный комплекс AspenONE Engineering. Ключевые компоненты. Области применения ключевых компонентов.
2. Понятие СУБД. Типы, отличия, области применения, программные продукты.
3. Minitab. Область применения, основные функции, пример решаемой задачи (цель-результат);
4. AspenONE Engineering и ChemCAD. Основные отличия. Пример задач для каждого комплекса.
5. Элементы ActiveX. Основные возможности. Пример задач (мин. 2), решаемых с помощью инструмента.

Примеры практического задания:

1. Рассчитать материальный баланс технологической схемы, состоящей из реактора, двухфазного сепаратора, колонны фракционирования, если известны: состав входного потока, набор реакций, конверсии исходных реагентов и селективность по целевому компоненту, необходимая мощность по продукту. Привести используемый программный продукт для расчета, алгоритм расчета с использованием выбранного программного продукта.

2. Известна транспортируемая среда, состав среды и фазовое состояние/распределение, давление и температура, рельеф прокладки трубопровода, расход среды. Определить диаметр трубопровода, определить возможность отложения твердых соединений или выпадения конденсата и условия образования данных отложений или конденсата. Используемые программные продукты, алгоритм расчета, выходные данные расчета узла запорной арматуры.

Результаты ответа определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно».

Оценка «отлично» выставляется студенту, если даны полные и правильные ответы на все вопросы билета, выполнено практическое задание; содержание ответа изложено логично и последовательно, практическое задание выполнено согласно актуальным нормативным и правовым актам; существенные фактические ошибки отсутствуют; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать исчерпывающие и правильные ответы на уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов. Не допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «хорошо» выставляется студенту, если даны не полные, но правильные по сути составляющей ответы на все вопросы; содержание ответа изложено логично и последовательно, практическая часть выполнена в полном объеме; присутствуют несущественные фактические ошибки; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать правильные ответы на все уточняющие и дополнительные вопросы экзаменатора по теме вопросов. Допускаются небольшие ошибки и погрешности, не имеющие принципиального характера.

Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если на большинство вопросов даны не полные, но правильные по сути составляющей ответы; содержание ответа изложено логично и последовательно, практическая часть выполнена верно по сути составляющей, но не соответствует требованиям актуальных нормативно-технических документов или допущены ошибки в графических изображениях; присутствуют несущественные фактические ошибки; ответ соответствует нормам русского литературного языка. Студент должен дать правильные ответы на большую часть уточняющих и дополнительных вопросов экзаменатора по теме вопросов. Допускаются ошибки и погрешности, имеющие принципиального характера.

Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если он не дал ответа на большинство вопросов; дал неверные, содержащие фактические ошибки, ответы на все вопросы; не смог ответить более чем на половину дополнительных и уточняющих вопросов преподавателя. «Неудовлетворительно» выставляется студенту, отказавшемуся отвечать на вопросы преподавателя.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/enrol/index.php?id=36095>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Introduction to Software for Chemical Engineers, Second Edition, Edited By Mariano Martín Martín, Copyright Year 2020, ISBN 9781138324213, Published June 25, 2019 by CRC Press, 802 Pages 24 Color & 548 B/W Illustrations

- Introduction to Software for Chemical Engineers, Second Edition, Edited By Mariano Martín Martín, Copyright Year 2020, ISBN 9781138324213, Published June 25, 2019 by CRC Press, 802 Pages 24 Color & 548 B/W Illustrations

б) ресурсы сети Интернет:

– открытые онлайн-курсы

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ –
<http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
– ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
– Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/> – ...

14. Материально-техническое обеспечение

Лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации.

Аудитория для выполнения практических занятий, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации, а также персональными компьютерами с установленным пакетом MS Office (MS Word, MS Excel) для выполнения практических заданий.

15. Информация о разработчиках

Норин Владислав Вадимович, ведущий специалист отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ», ассистент кафедры неорганической химии ХФ НИ ТГУ;

Решетников Дмитрий Михайлович, начальник отдела предпроектной подготовки ООО «ИХТЦ»